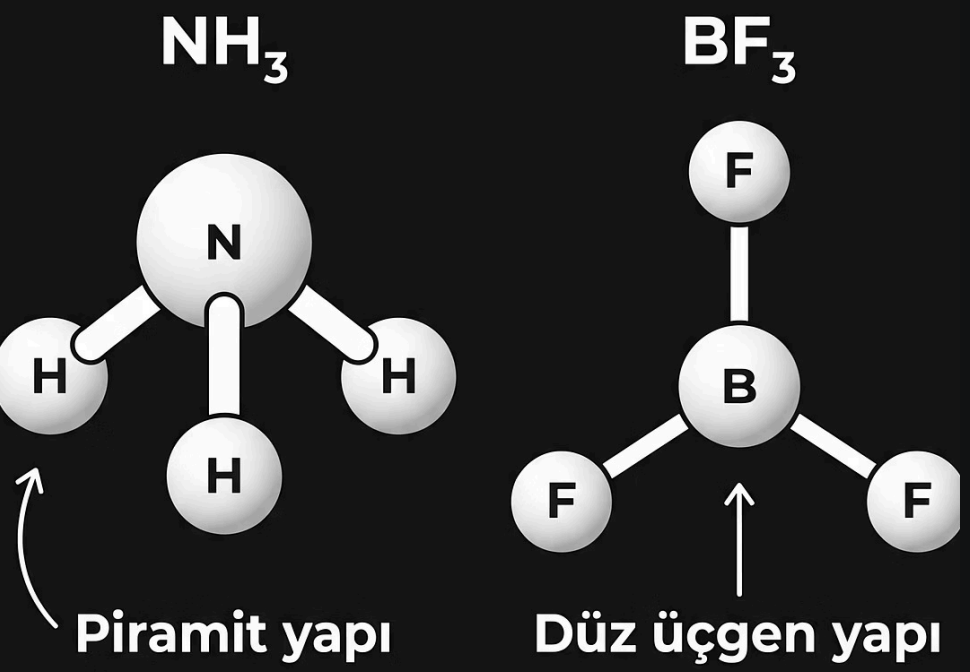


XH_3 Molekülleri: Üçgen Piramit ve Düzlem Üçgen Geometriler

Ders Sunumu

Teradigma

Giriş: Aynı Formül, Farklı Geometri

Üç hidrojen atomu + merkezi atom → XH_3 formülü

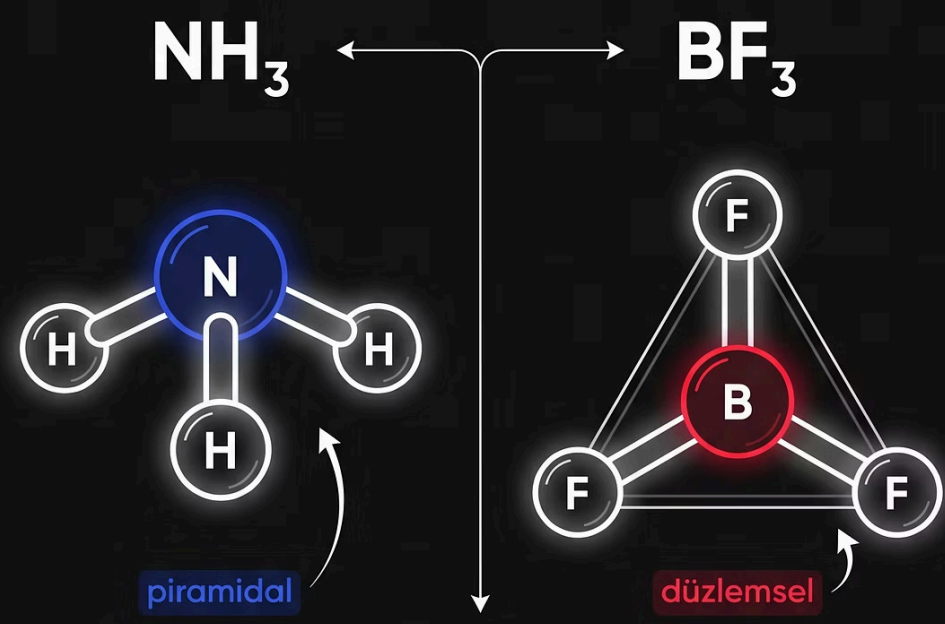
NH_3 (amonyak)

Üçgen piramit (trigonal pyramidal)

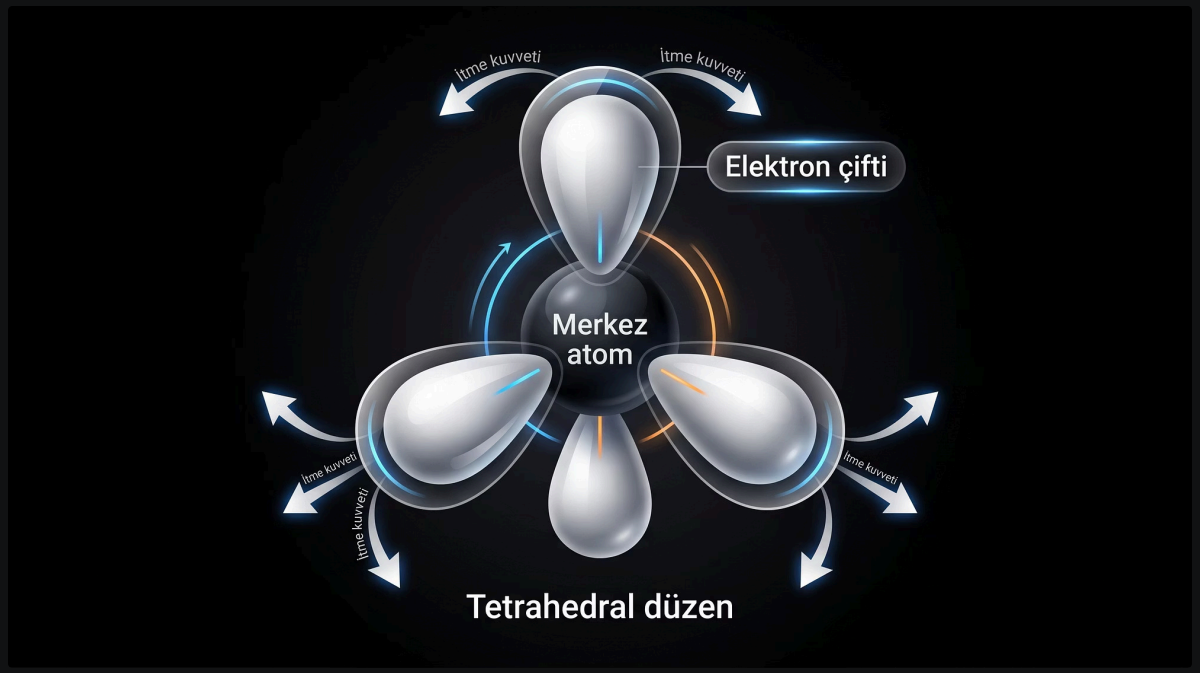
BF_3 (bor triflorür)

Düzlem üçgen (trigonal planar)

Aynı formül, neden iki farklı üç boyutlu yapı? Cevap, merkezi atomun elektronik yapısında gizlidir.



VSEPR Teorisi: Temel Çerçeve



VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) teorisi, gözlemlenen geometrileri açıklayan betimleyici bir modeldir — geometrileri "oluşturan" bir fail değil.

Temel İlke

Elektron çiftleri, birbirinden mümkün olan en uzak mesafede konumlandırılmış biçimdedir.

Sterik Sayı (SN)

SN = bağ çifti sayısı + yalnız çift sayısı

Belirleyici Rol

SN, hem elektron çifti geometrisini hem de moleküler geometriyi belirler.

NH_3: Elektronik Yapı ve Sterik Sayı

Azot atomu beş değerlik elektronu taşır; üç H atomuyla bağ kurulduktan sonra bir yalnız elektron çifti kalır.

> Yalnız çift, atomların tanımladığı geometriden "görünmez" ancak bağ açılarını derinden etkiler.

01

SN Hesabı

SN = 3 (bağ çifti) + 1 (yalnız çift) = **4**

02

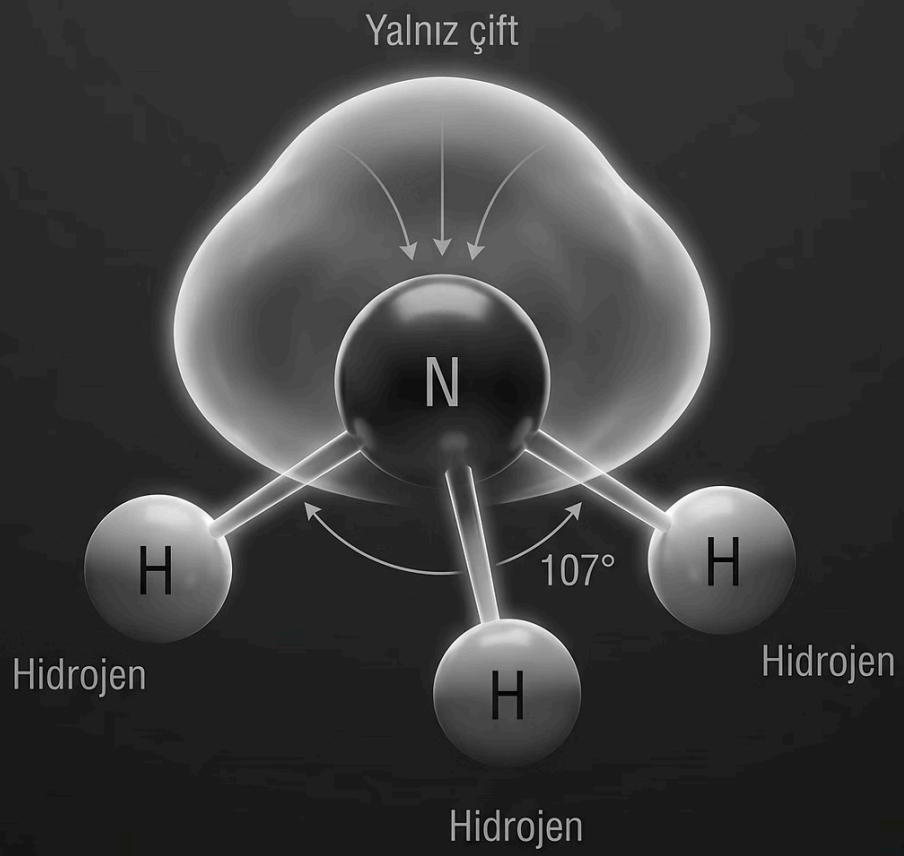
Elektron Çifti Geometrisi

Tetrahedral

03

Moleküler Geometri

Üçgen piramit (yalnızca atom konumları)



NH_3: Bağ Açısı ve Yalnız Çiftin Etkisi

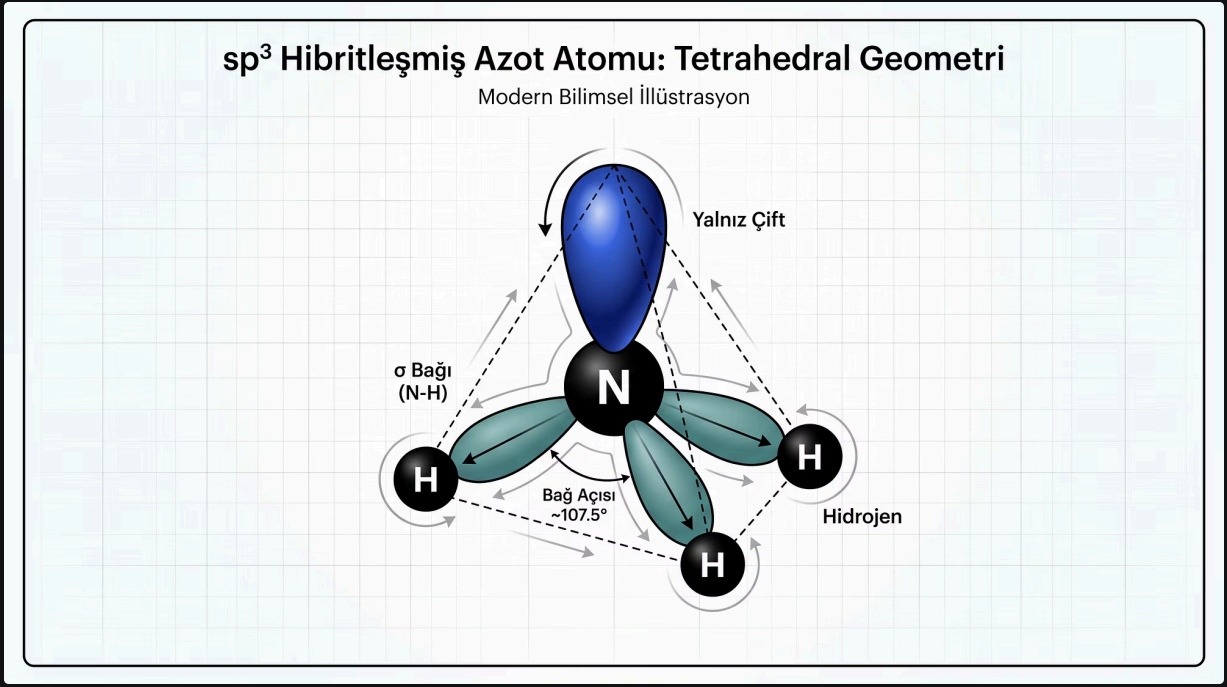
İdeal tetrahedral açı 109.5° iken NH_3'te H-N-H bağ açısı yaklaşık **107°** olarak ölçülmüştür.

İtme hiyerarşisi şu şekilde sıralanır:

1. **Yalnız çift – Yalnız çift**
   En güçlü itme
2. **Yalnız çift – Bağ çifti**
   Orta düzey itme
3. **Bağ çifti – Bağ çifti**
   En zayıf itme

Yalnız çift, tek bir çekirdeğin etkisinde kaldığı için daha geniş alan kaplar; bağ çiftlerini sıkıştırarak bağ açısını 2.5° daraltır.

NH_3: sp^3 Hibridizasyonu



Azot atomu, 2s ve üç 2p orbitalinin kombinasyonundan oluşan dört sp^3 hibrit orbital taşır.

s/p Karakteri

%25 s karakteri, %75 p karakteri (1:3 oranı)

Üç Sigma Bağı

Üç hibrit orbital → H atomlarının 1s orbitalleriyle üç N-H sigma bağı

Yalnız Çift Orbitali

Dördüncü hibrit orbital → yalnız elektron çifti; Lewis bazı özelliğini belirler

BF_3: Elektronik Yapı ve Sterik Sayı

Bor atomu üç değerlik elektronu taşır; üç F atomuyla bağ kurulduğunda hiçbir yalnız elektron çifti kalmaz.

Yalnız çiftin yokluğu, tüm bağların aynı düzlemde eşit açılarla dağıtılmış biçimde bulunmasıyla sonuçlanır.

01

SN Hesabı

SN = 3 (bağ çifti) + 0 (yalnız çift) = **3**

02

Elektron Çifti Geometrisi

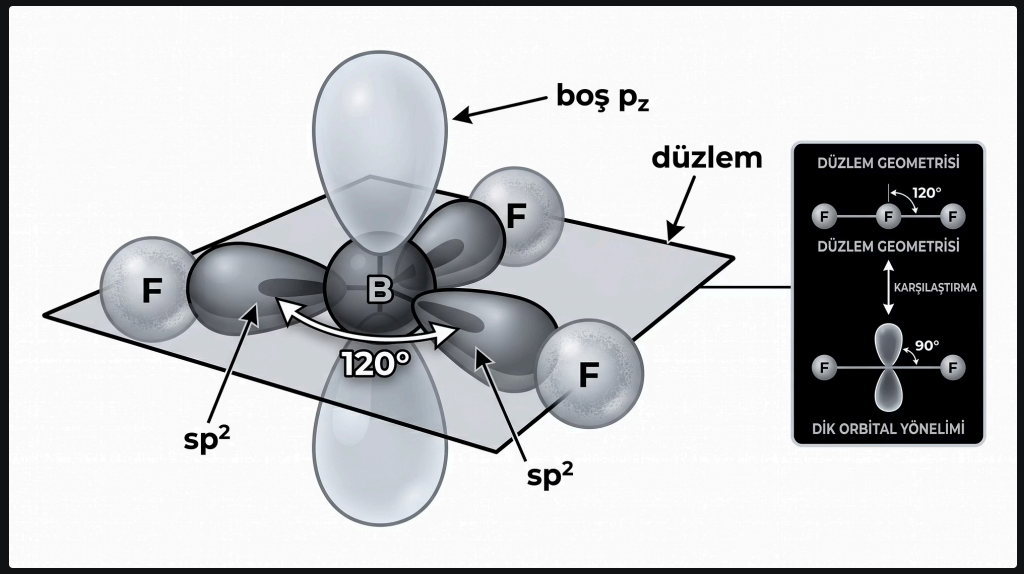
Düzlem üçgen

03

Moleküler Geometri

Düzlem üçgen (ikisi özdeştir)

BF_3: sp^2 Hibridizasyonu ve Geometri



Bor atomu 2s ve iki 2p orbitalinin (px, py) kombinasyonundan üç sp^2 hibrit orbital taşır.

s/p Karakteri

%33.3 s karakteri, %66.7 p karakteri (1:2 oranı)

Düzlemsel Düzenleme

Üç sp^2 orbital aynı düzlemde, aralarında tam 120° ile düzenlenmiş biçimdedir.

pz Orbitali

Hibridizasyona katılmayan pz orbitali bu düzleme dik kalır.

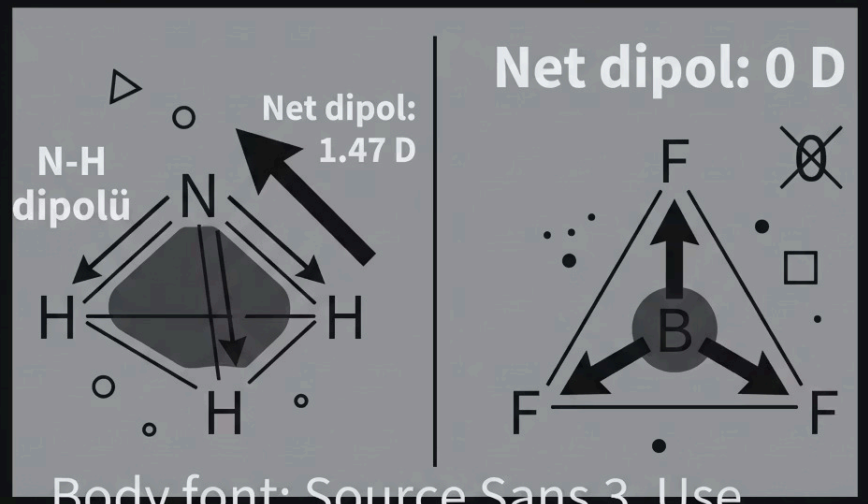
Simetri

F-B-F bağ açısı tam 120°; molekül D3h nokta grubu simetrisine sahiptir.

sp^3 ve sp^2 Hibridizasyonunun Karşılaştırması

Özellik	NH_3 (sp^3)	BF_3 (sp^2)
SN	4	3
s karakteri	%25	%33.3
p karakteri	%75	%66.7
Bağ açısı	~107°	120°
Geometri	Üçgen piramit	Düzlem üçgen
Yalnız çift	1	0

Polarite: NH_3 ve BF_3 Karşılaştırması



Body font: Source Sans 3. Use it for paragraphs and smaller text.

ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ

This is the accent color, use it for highlights and decorations

abcdefghijklmnopqrstuvwxyz

0123456789.

Bağ polaritesi ve geometri birlikte molekülün net dipol momentini belirler.

NH_3 — Polar

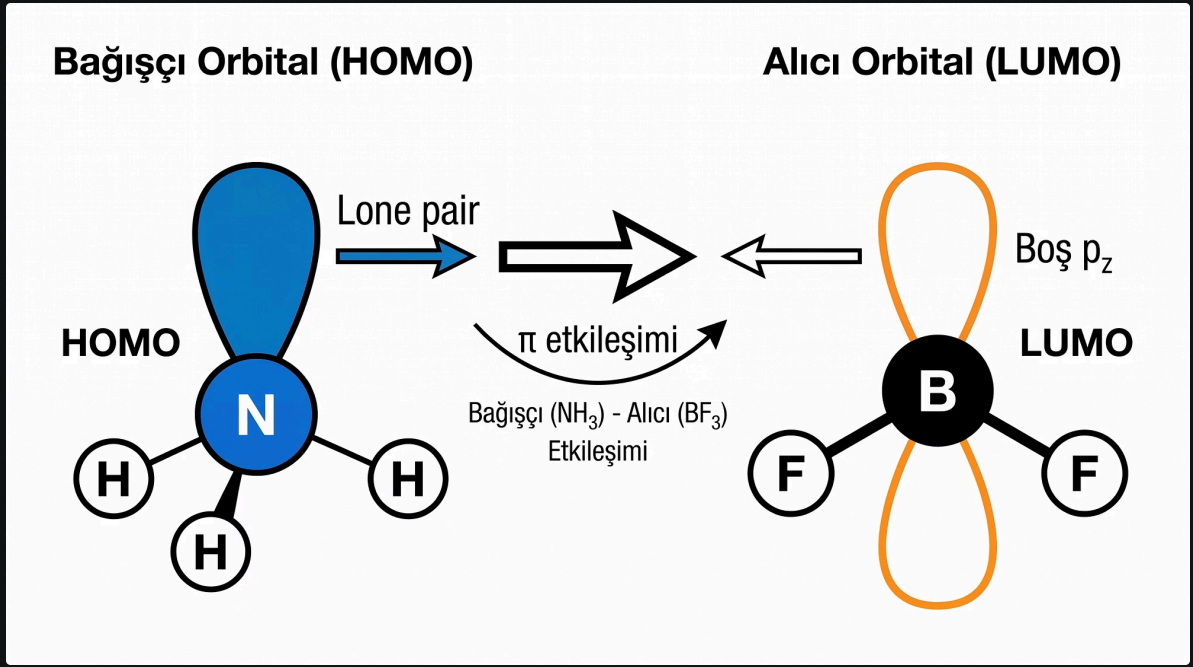
N elektronegatifliği (3.04) > H elektronegatifliği (2.20); piramit geometrisi dipol momentlerini götürmez → net μ ≈ 1.47 D

BF_3 — Apolar

Her B-F bağı güçlü biçimde polardır (F elektronegatifliği 3.98), ancak düzlem üçgen geometri üç dipol momentini tam olarak götürür → μ = 0

Geometri, polariteyi doğrudan belirleyen yapısal unsurdur.

Moleküler Orbital Teorisi Perspektifi



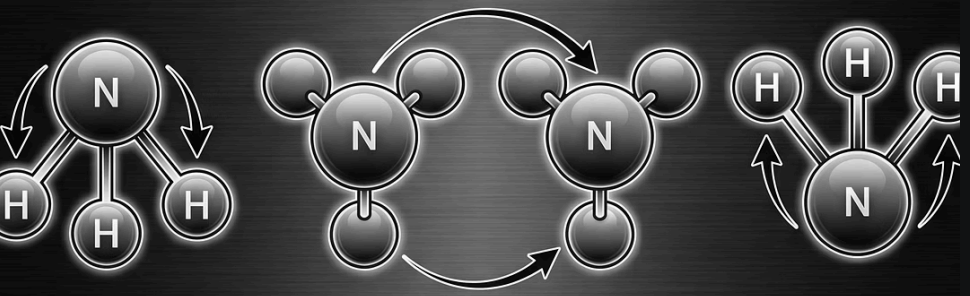
MO teorisine göre elektronlar, atomik orbitaller yerine tüm moleküle yayılmış moleküler orbitallerde bulunur.

NH_3'te MO

Üç bağlayıcı MO + bir bağlayıcı olmayan (non-bonding) MO (yalnız çift); HOMO bu orbitaldir ve nükleofil özelliği buradan kaynaklanır.

BF_3'te MO

Üç sp^2 orbital tamamen bağlayıcı MO'larda kullanılır; boşta kalan pz orbitali F atomlarının p orbitalleriyle zayıf pi bağlaşması gösterir.



Piramit İnversiyonu: Kavram

NH_3 molekülünde azot atomu, H atomlarının oluşturduğu düzlemden karşı tarafa geçer — sanki şemsiye tersine dönüyormuş gibi.

İnversiyon Hızı

Oda sıcaklığında yaklaşık 2×10^{11} kez/saniye gerçekleşir.

Geçiş Durumu

Azot, H atomlarıyla aynı düzlemde; geçici sp^2 karakteri taşır.

Potansiyel Enerji

Eğri çift çukurlu (double-well) yapıdadır.

Piramit İnversiyonunu Belirleyen Üç Faktör

İnversionun bu denli hızlı gerçekleşmesi üç eşzamanlı koşula bağlıdır:

Düşük Enerji Bariyeri

NH_3 için yaklaşık 24.2 kJ/mol (5.8 kcal/mol)

Dar Bariyer Genişliği

İki piramit konfigürasyonu arasındaki geometrik mesafe küçüktür.

Kuantum Tünelleme

H atomlarının düşük kütlesi tünellemeyi kolaylaştırır; inversiyon hızını yaklaşık 80 kat artırır.

Kuantum Tünelleme ve Amonyak Mazerı

Klasik mekanikle açıklanamayacak kadar hızlı olan inversiyon, Schrödinger denkleminin çözümlerinden doğal biçimde ortaya çıkan bir sonuçtur.

01

Dalga Fonksiyonu

Dalga fonksiyonu, potansiyel bariyerin her iki tarafında sıfırdan farklı genliğe sahiptir.

02

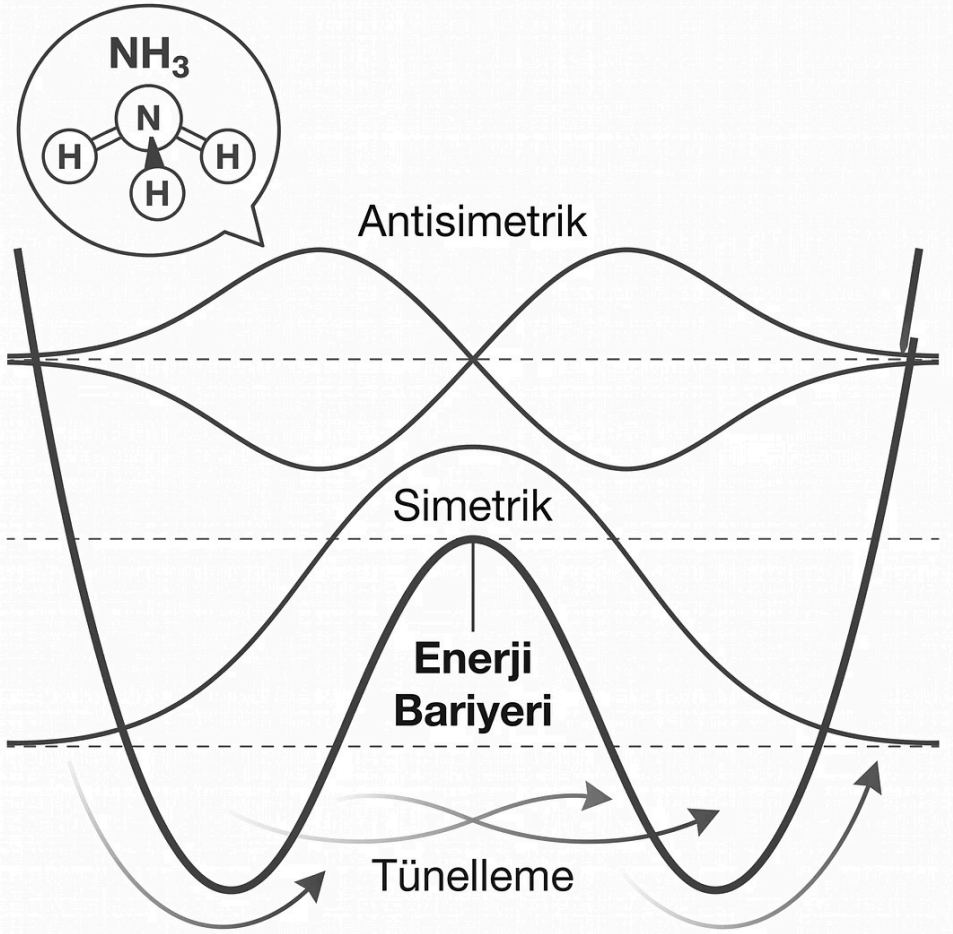
Süperpozisyon

Simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonlarının süperpozisyonu, iki konfigürasyon arasında salınıma yol açar.

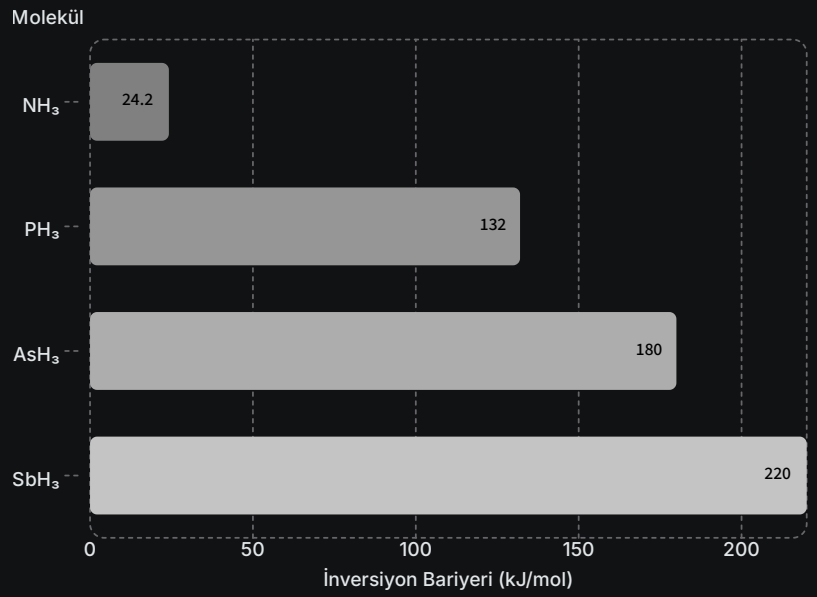
03

Amonyak Mazeri

Enerji seviyelerinin ikiye ayrılması (splitting), **amonyak mazerinin** temelini oluşturur.



Grup 15 Elementlerinde İnversiyon Bariyeri Karşılaştırması



Periyodik cetvelde aşağı inildikçe inversiyon bariyeri yükselir ve piramit konfigürasyonu daha kararlı hale gelir.

Bu fark; merkezi atomun büyüyen boyutundan, 3p orbitallerinin 2p'ye göre daha yayvan olmasından ve hibridizasyondaki farklılıklardan kaynaklanır.

NH_3

~24.2 kJ/mol — hızlı inversiyon

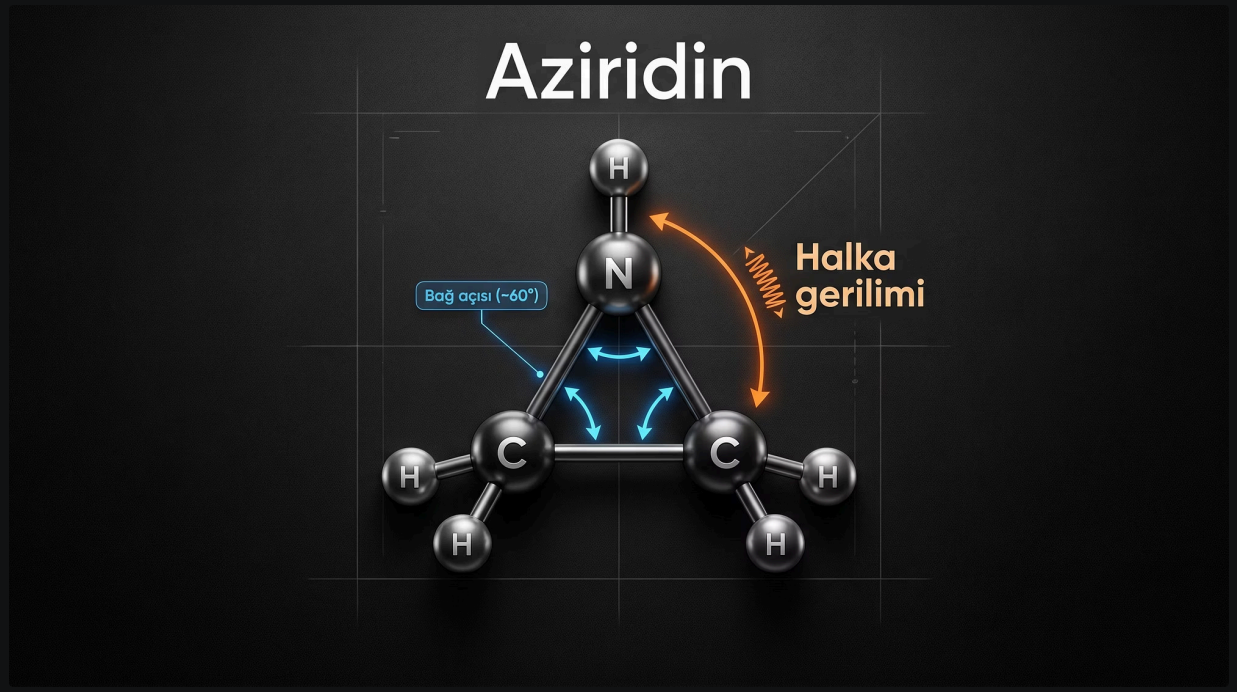
PH_3 (fosfin)

~132 kJ/mol — yavaş inversiyon

AsH_3, SbH_3

Bariyerler daha da yüksektir.

Sübstitüent Etkisi: Halkaya Bağlı Azot



H atomlarının farklı gruplarla değiştirilmesi, inversiyon bariyerini doğrudan etkiler.

N-Metil Türevleri

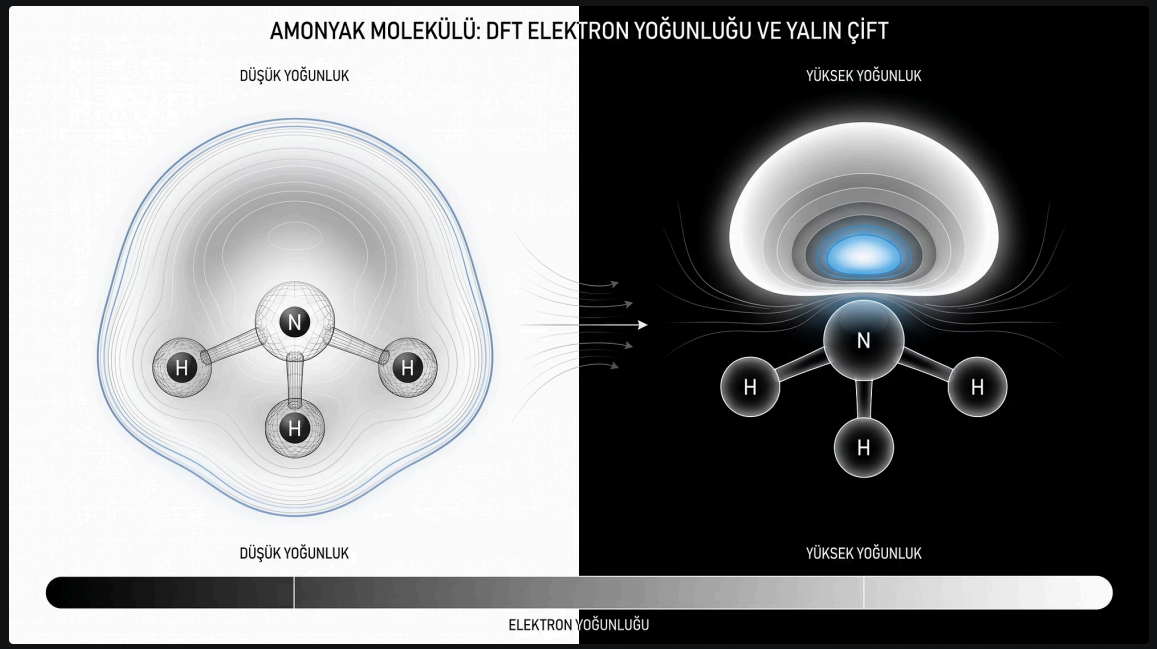
Bariyerin sübstitüentin sterik hacmiyle arttığı gözlemlenir.

Aziridin (Üç Üyeli Halka)

Bariyeri ~80 kJ/mol'e yükselir.

⚠ Halka gerginliği, geçiş durumunda N-C-N bağ açısının genişlemesini engeller; bu da inversiyonu kısıtlayan mekanik bir koşul oluşturur.

DFT Hesaplamaları: Elektron Yoğunluğu Dağılımı



Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) çalışmaları, NH_3'te yalnız elektron çiftinin bağ bölgelerine kıyasla belirgin biçimde daha yüksek elektron yoğunluğu taşıdığını ortaya koyar.

- Kohn-Sham orbitalleri yalnız çiftin merkezi atomun çekirdeğine daha yakın yoğunlaştığını gösterir.
- Bu yüksek yoğunluk, yalnız çiftin bağ açıları üzerindeki güçlü etkisini nicel olarak açıklar.
- CBS-QB3 düzeyindeki post-Hartree-Fock hesaplamaları, 24.2 kJ/mol'lük inversiyon bariyeriyle deneysel değerlerle uyumludur.

Betimleyici Yasalar ile Kurucu Nedenler Arasındaki Ayrım

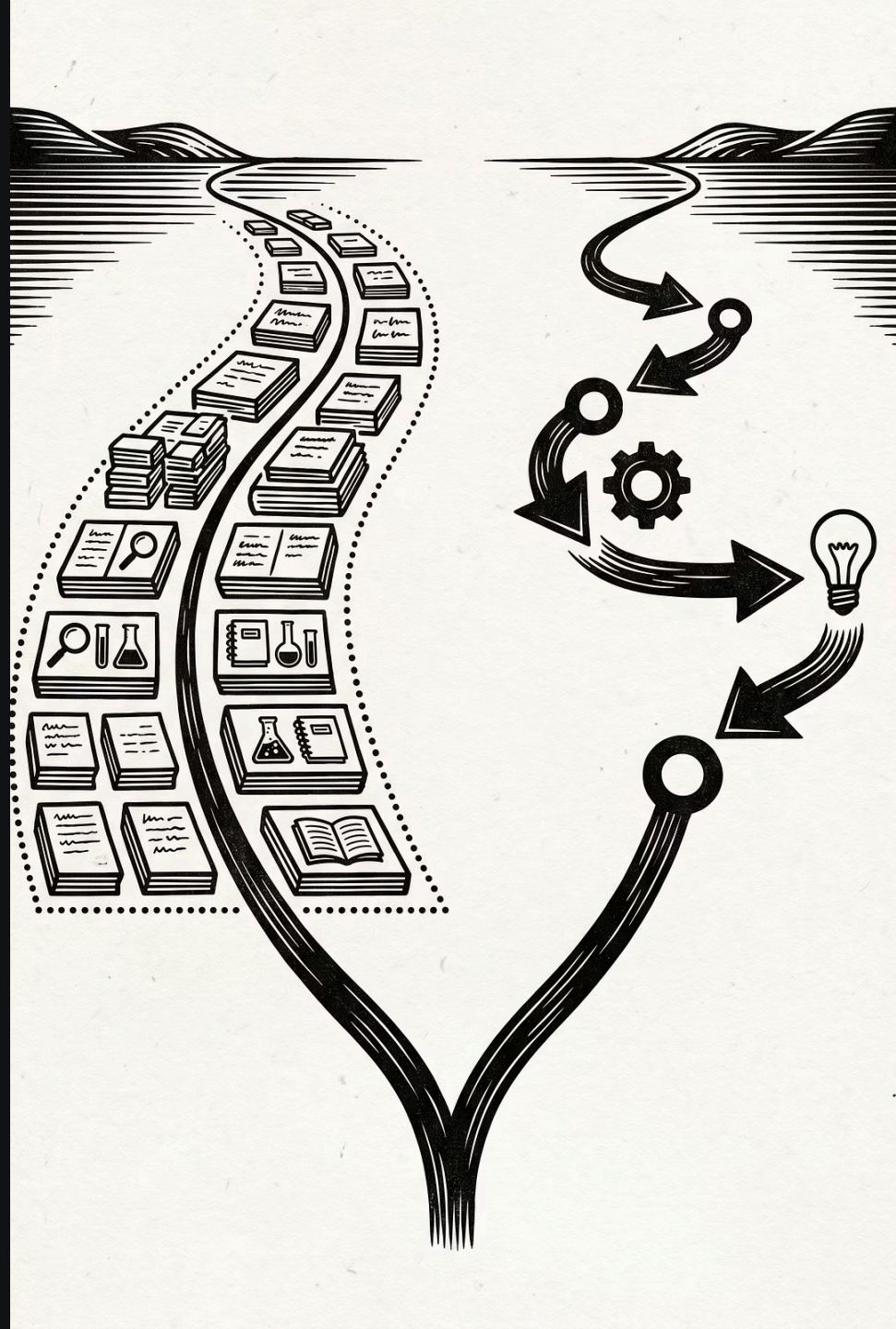
Moleküler geometri analizinde sıklıkla karşılaşılan dil hataları, nedensellik açısından ciddi sorunlar içerir.

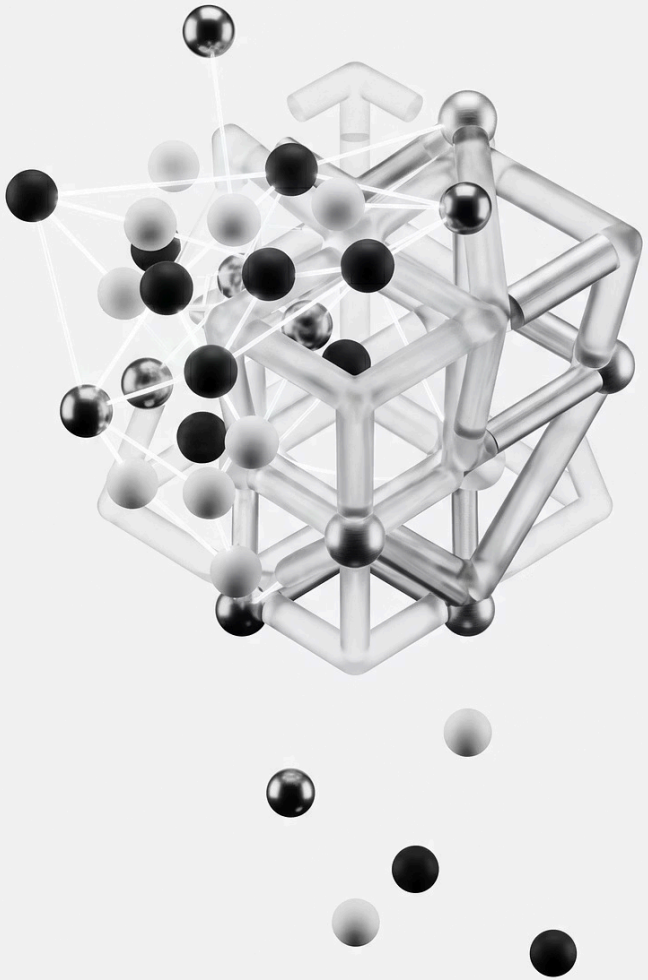
> **"VSEPR teorisi molekülü şu şekle sokar"**
>
> → VSEPR, geometriyi betimler; oluşturmaz.

> **"Elektronlar en düşük enerji durumunu seçer"**
>
> → Seçim yoktur; minimum enerji durumu elde edilir.

> **"Hibridizasyon bağ kurar"**
>
> → Hibridizasyon, valans bağ teorisinin matematiksel aracıdır; fiziksel bir fail değildir.

Bilimsel yasalar "ne olduğunu" betimler; düzenliliğin kaynağını açıklamaz.





Hammadde ile Oluşturulmuş Yapı Arasındaki Fark

NH_3 şöyle inşa edilmiş biçimdedir: 7 proton + 7 nötron + 10 elektron (N) + 3 proton + 3 elektron (3H)

NH_3'te Ortaya Çıkan Özellikler

Lewis bazı olma, pKa = 9.25, dipol momenti 1.47 D, piramit inversiyonu, hidrojen bağı kurabilme — bunların hiçbiri tek başına N veya H atomunun niteliği değildir.

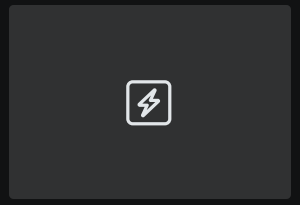
BF_3'te Ortaya Çıkan Özellikler

Lewis asidi özelliği, düzlem üçgen geometri, apolar karakter — bunların hiçbiri tek başına bor ya da flor atomunun niteliği değildir.

Parçaların toplamından fazla olan bütün, organizasyonel bir kompleksite sorusunu gündeme taşır.

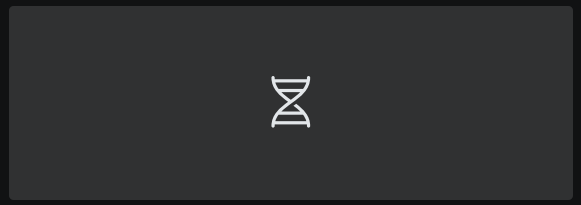
Çok Katmanlı Organizasyon

XH_3 moleküllerinde gözlemlenen düzen, iç içe geçmiş dört katmanda yapılandırılmış biçimdedir:



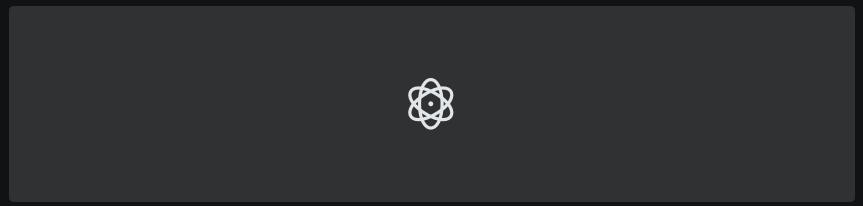
Enerjetik Düzey

Bağ enerjileri ve hibridizasyon stabilitesi optimize edilmiş biçimdedir.



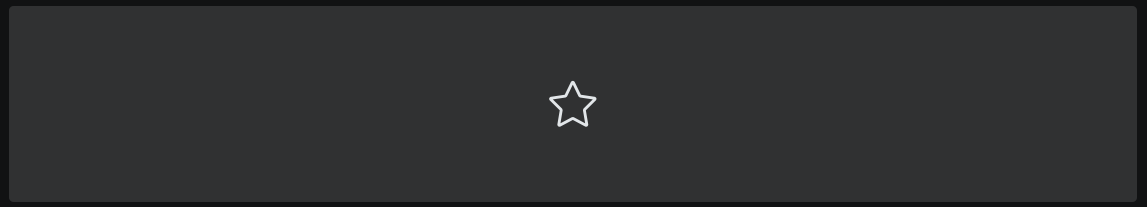
Moleküler Düzey

Atomlar spesifik geometrik düzenlemelerle bir araya gelir.



Atomik Düzey

Proton sayısı elementin kimyasal özelliklerini belirler.



Kuantum Düzeyi

Elektronlar spesifik orbital konfigürasyonlarında bulunur.

Her katman bir öncekinin üzerine inşa edilir; her katmanda yeni özellikler sistematik biçimde ortaya çıkar.

Fonksiyonel Entegrasyon: NH_3 ve BF_3

Her molekülde özellikler, işlevsel bir zincir oluşturacak biçimde entegre edilmiş haldedir.

Piramit Geometrisi

NH_3'ün temel yapısal özelliği

Polarite

Net dipol momenti 1.47 D

Hidrojen Bağı

Moleküller arası etkileşim

Yüksek Kaynama Noktası

Çözücü özelliği kazanır

Düzlem Geometri

BF_3'ün temel yapısal özelliği

Boş pz Orbitali

Elektron alıcı bölge

Lewis Asidi

Elektron çifti kabul eder

Koordinasyon Kompleksleri

Çeşitli Lewis bazlarıyla bağ kurar

Her özellik diğerleriyle uyumludur; zincirin herhangi bir halkasının değişmesi molekülün genel işlevselliğini bozar.

Dersin Sentezi

XH_3 moleküllerinde gözlemlenen düzen, çok boyutlu ve hassas bir organizasyona sahiptir:

Bağ Açısındaki Sapma

H-N-H bağ açısındaki 2.5°'lik sapma rastgele değil; itme hiyerarşisinin dengelenmesiyle elde edilmiş spesifik bir değerdir.

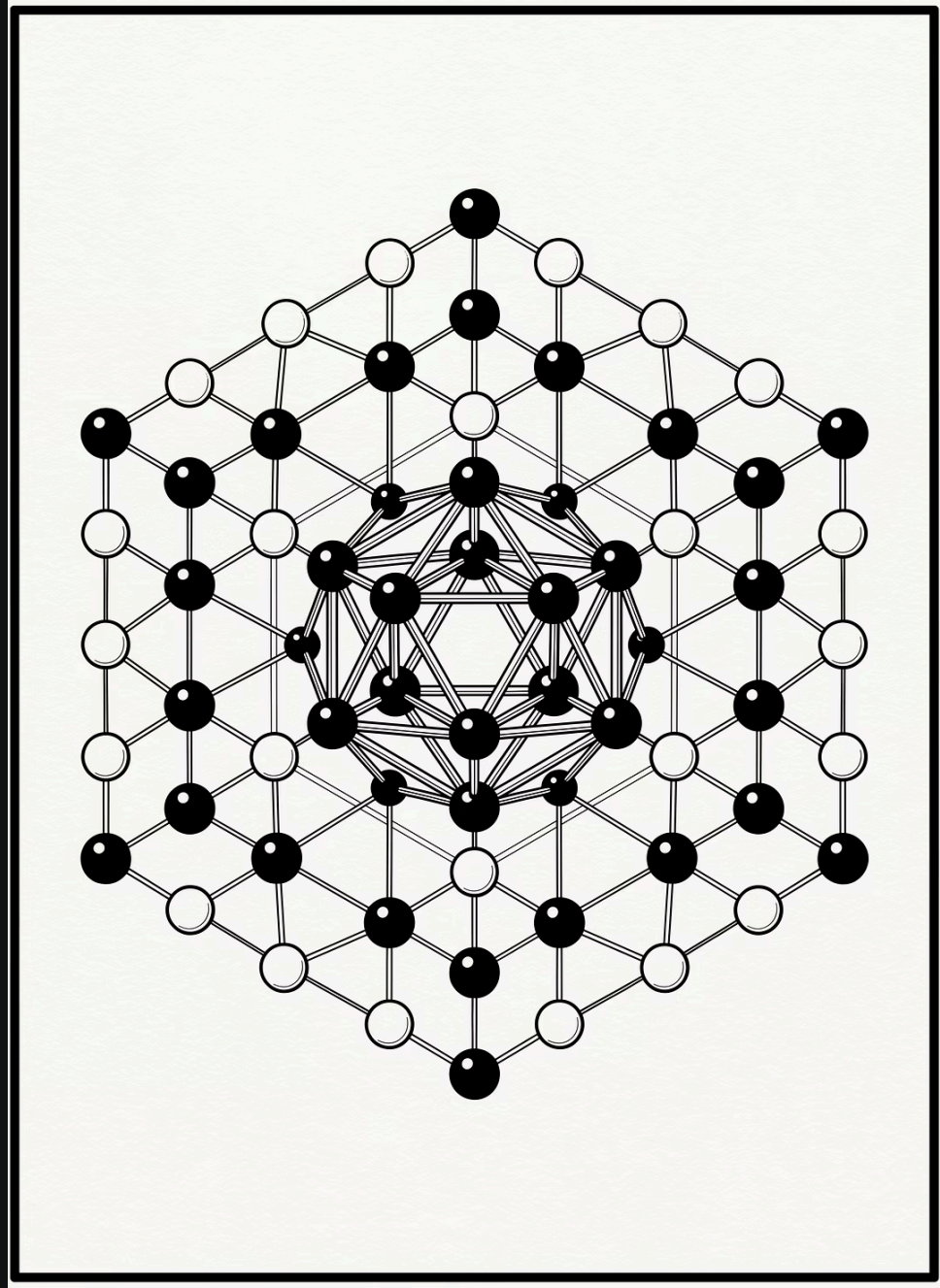
Hibridizasyon Oranları

Matematiksel olarak basit kesirler (1:3 ve 1:2) biçiminde tezahür eder.

İnversiyon Bariyeri

Hız ve kararlılığı eş zamanlı sağlayacak biçimde değerlendirilmiş haldedir.

Kuantum Tünelleme Koşulları

Gereken üç koşul (düşük bariyer, dar genişlik, küçük kütle) eş zamanlı olarak sağlanmış durumdadır.

> Cansız parçacıkların, kendilerinde bulunmayan özelliklere sahip işlevsel bütünler oluşturması; bu organizasyonun kaynağına dair derin bir tefekkürü zorunlu kılar.